

This Page Is Inserted by IFW Operations
and is not a part of the Official Record

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images may include (but are not limited to):

- BLACK BORDERS
- TEXT CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES
- FADED TEXT
- ILLEGIBLE TEXT
- SKEWED/SLANTED IMAGES
- COLORED PHOTOS
- BLACK OR VERY BLACK AND WHITE DARK PHOTOS
- GRAY SCALE DOCUMENTS

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

**As rescanning documents *will not* correct images,
please do not report the images to the
Image Problem Mailbox.**

(19)



JAPANESE PATENT OFFICE

PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11) Publication number: **11152288 A**(43) Date of publication of application: **08.06.99**

(51) Int. Cl.

C07F 3/04
B60R 21/26
C06B 43/00
C06D 5/00

(21) Application number: **09318412**(22) Date of filing: **19.11.97**(71) Applicant: **DAICEL CHEM IND LTD**

(72) Inventor: **NISHIKAWA KAZUYOSHI**
GO KENSHIYUU

(54) **DI(CARBOHYDRAZIDO-O,N) CALCIUM(II)**
NITRATE-HYDRATE AND ITS DEHYDRATED
COMPLEX AND THEIR PRODUCTION AND GAS
GENERATOR COMPOSITION

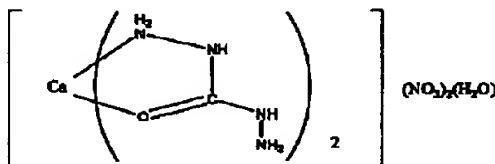
give a dehydrated complex.

COPYRIGHT: (C)1999,JPO

(57) Abstract:

PROBLEM TO BE SOLVED: To obtain a new compound useful as a gas-generating component for air bags used for driver-protecting devices in automobiles.

SOLUTION: Di(carbohydrazido-O,N) calcium (II) nitrate-hydrate of the formula. The compound of the formula is obtained, for example, by allowing calcium nitrate to react with carbohydrazide. For example, a method comprising allowing calcium nitrate tetrahydrate to react an about twofold amount of carbohydrazide in water under heating, concentrating the obtained reaction solution, cooling the concentrated solution to precipitate white crystals, if necessary, recrystallizing the crystals in a mixture solvent of water with an alcohol, washing the obtained crystals with ethanol, and subsequently drying the crystals in air for about 24 hr is adopted as a preferable embodiment. The obtained di(carbohydrazido-O,N) calcium (II) nitrate-hydrate is thermally dehydrated to



(19)日本国特許庁 (J P)

(12)公開特許公報 (A)

(11)特許出願公開番号

特開平 1 1 - 1 5 2 2 8 8

(43)公開日 平成 1 1 年 (1 9 9 9) 6 月 8 日

(51)Int. Cl.⁶

識別記号

F I

C07F 3/04

C07F 3/04

B60R 21/26

B60R 21/26

C06B 43/00

C06B 43/00

C06D 5/00

C06D 5/00

Z

審査請求 未請求 請求項の数 7 O L (全 6 頁)

(21)出願番号 特願平 9 - 3 1 8 4 1 2

(22)出願日 平成 9 年 (1 9 9 7) 1 1 月 1 9 日

(71)出願人 0 0 0 0 0 2 9 0 1

ダイセル化学工業株式会社

大阪府堺市鉄砲町 1 番地

(72)発明者 西川 和良

兵庫県姫路市網干区新在家 1 3 6 5 - 2

(72)発明者 呉 建洲

兵庫県姫路市網干区余子浜 1 9 0 3 - 3 -
2 2 4

(74)代理人 弁理士 古谷 馨 (外 3 名)

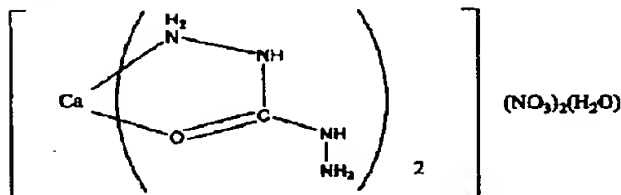
(54)【発明の名称】 ジ (カルボヒドラジド- O, N) カルシウム (I I) 硝酸塩一水和物及びその脱水錯体とそれらの製造方法及びガス発生剤組成物

(57)【要約】

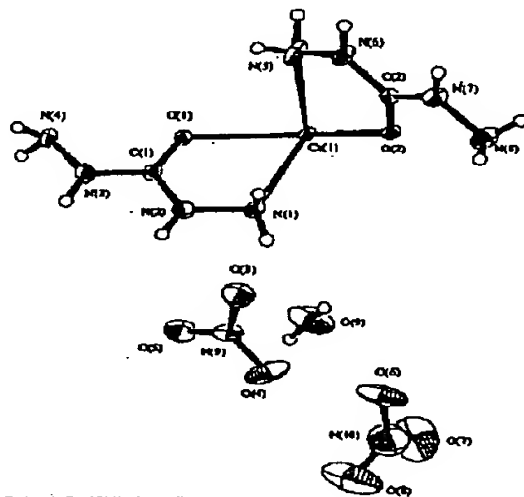
【課題】 低毒性かつ危険性が少なく取扱いが容易であり、燃焼効率及びガス発生効率に優れたガス発生剤組成物を提供する。

【解決手段】 式

【化 1】



で表される新規なジ (カルボヒドラジド- O, N) カルシウム (I I) 硝酸塩一水和物及びその脱配位水錯体とその製造方法並びにそれを含有する自動車における乗員保護装置としてのエアバッグ用ガス発生剤組成物。



結晶パラメータ及び配位原子距離

三斜晶系

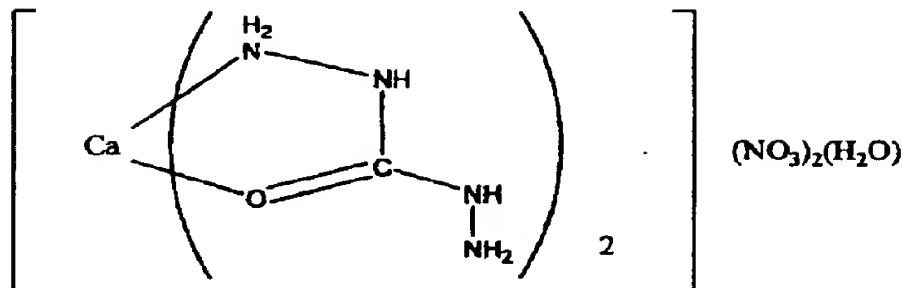
空間群: P - 1

格点定数: a = 9.3222(7) Å, b = 9.3257(11) Å, c = 8.1681(6) Å, α = 91.512(6)°, β = 99.71(2)°, γ = 69.732(5)°, V = 682.45(9) Å³.

原子間距離: Ca(1)-O(1) 2.443(7) Å, Ca(1)-O(2) 2.415(7) Å, Ca(1)-N(1) 2.807(8) Å, Ca(1)-N(2) 2.831(8) Å.

【特許請求の範囲】

【請求項 1】 式



で表されるジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物及びその脱水錯体。

【請求項 2】 カルボヒドラジドと硝酸カルシウムとを反応させることを特徴とする請求項 1 記載のジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物の製造方法。

【請求項 3】 ジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物の加熱脱水を特徴とする請求項 1 記載のジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物の脱水錯体の製造方法。

【請求項 4】 ジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物あるいはその脱水錯体を含有することを特徴とするガス発生剤組成物。

【請求項 5】 ジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物あるいはその脱水錯体を 40 乃至 90 重量％、酸化剤を 10 乃至 60 重量％含有する請求項 4 記載のガス発生剤組成物。

【請求項 6】 ジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物あるいはその脱水錯体を 40 乃至 80 重量％、酸化剤を 10 乃至 60 重量％、バインダを 10％以下、スラグ形成剤を 10％以下、成型助剤を 5％以下含有する請求項 4 記載のガス発生剤組成物。

【請求項 7】 酸化剤が硝酸カリウム、硝酸ナトリウム、硝酸ストロンチウム、硝酸アンモニウム、亜硝酸カリウム、亜硝酸ナトリウム、過塩素酸カリウム、過塩素酸ナトリウムから選ばれる少なくとも 1 種である請求項 5 又は 6 記載のガス発生剤組成物。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】 ジ（カルボヒドラジド－O，N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物及びその脱水錯体とその製造方法並びに自動車における乗員保護装置としてのエアバッグ用ガス発生剤組成物に関する。

【0002】

【従来の技術】 カルボヒドラジドに関する金属錯体は、

【化 1】

ジュルナール ニエオルガニーチェスコイヒミー

【Zh. Neorg. Khim., 26(8), 2134(1981)】に見出すことが

できる。この文献に記載されているカルボヒドラジド錯体は、金属元素がコバルト、ニッケル、マンガン、亜鉛といった遷移金属であり、さらに金属にカルボヒドラジド分子端の 2 個の空薬で配位し、金属との間に 6 員環キレートを形成していることが示されている。

【0003】 一方、自動車における乗員保護装置としてのエアバッグ用ガス発生剤としては、従来からアジ化ナトリウムを用いた組成物が多用されてきた。しかし、近年、アジ化ナトリウムの取扱い時の危険性が問題視されてきている。そこでこれに替わるより安全ないわゆる非アジ系ガス発生剤組成物として各種の含窒素有機化合物を含むガス発生剤組成物が開発されている。たとえば、米国特許 4, 909, 549 号には水素を含むテトラゾール、トリアゾール化合物と酸素含有酸化剤との組成物が、米国特許 4, 369, 079 号には水素を含まないピテトラゾールの金属塩と酸素含有酸化剤との組成物が、また特開平 6-239683 にはカルボヒドラジドと酸素含有酸化剤との組成物が開示されている。

【0004】

【発明が解決しようとする課題】 しかし、カルボヒドラジドのカルシウム硝酸塩錯体に関する知見は今までに開示されておらず、それを用いたガス発生剤組成物に関する知見もまた同様である。

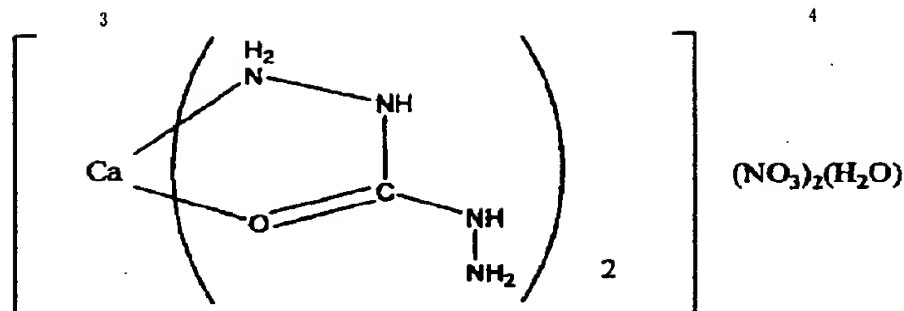
【0005】

【課題を解決するための手段】 本発明者等は、カルボヒドラジドのカルシウム硝酸塩錯体の製造及び錯体の構造解明に関して鋭意研究を重ね、カルシウムに対してはカルボヒドラジド分子中の酸素と分子端の空薬での配位により 5 員環キレートを形成することを見出した結果、本発明に至った。

【0006】 即ち本発明は、式

【0007】

【化 2】



【 0 0 0 8 】で表される新規なジ（カルボヒドラジドー
O、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物及びその脱水
錯体を提供するものである。

【 0 0 0 9 】

【発明の実施の形態】図 1 は、水から再結晶化したジ
（カルボヒドラジドー O、N）カルシウム（II）硝酸塩
一水和物（[Ca（CDH）；（NO₃）；（H₂O）]と
略記）の単結晶 X 線結晶構造解析を行った結果と結晶パ
ラメータ及び配位原子間距離を示したものである。この
結果は、得られた錯体が、カルボヒドラジド 2 分子が各
々酸素原子、窒素原子でカルシウムに配位した硝酸塩錯
体であることを示しており、従来公知の遷移金属のカル
ボヒドラジドが金属にカルボヒドラジド分子端の 2 個の
窒素で配位し、金属との間に 6 員環キレートを形成した
構造とは著しく異なっている。

【 0 0 1 0 】本発明の上記新規化合物は、カルボヒドラ
ジドと硝酸カルシウムを反応させることにより得られ
る。即ち、本発明のジ（カルボヒドラジドー O、N）カ
ルシウム（II）硝酸塩一水和物は、硝酸カルシウムとカ
ルボヒドラジドを水溶液で反応させ、過剰の水を濃縮冷
却するか又はアルコールなどを添加することにより結晶
として得ることができる。反応温度は水溶液として安全
に存在し得る限り任意であるが、20℃乃至 90℃程度が望
ましい。

【 0 0 1 1 】本発明のジ（カルボヒドラジドー O、N）
カルシウム（II）硝酸塩一水和物の製造方法の好ましい
実施形態は次の如くである。即ち、硝酸カルシウム四水
和物と 2 倍モル数のカルボヒドラジドを水に加熱溶解
し、反応させ、該反応液を濃縮し、冷却すると白色結晶
が得られる。この際、濃縮せずにエタノール等のアルコ
ール類を、水溶液とほぼ同量程度加えても同様に結晶は
得られる。また、小さな結晶粒度の錯体を所望するときは、
冷却時に急冷することが望ましい。

【 0 0 1 2 】得られた結晶は必要に応じて水または水と
アルコールとの混合溶媒から更に再結晶化して用いるこ
とも可能である。これを濾別した後エタノールで洗浄し
24 時間程度風乾すれば、目的のジ（カルボヒドラジドー
O、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物が得られる。
この錯体をさらに高温で放置すると、水を脱離し、ジ
（カルボヒドラジドー O、N）カルシウム（II）硝酸塩
一水和物の脱水錯体（[Ca（CDH）；（NO₃）；]と
略記）が得られる。

【 0 0 1 3 】本発明に関わる新規なジ（カルボヒドラジ
ドー O、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物は、自動
車における乗員保護装置としてのエアバッグ用のガス発
生剤成分として用いた場合には、安全であり、かつ優れた
性能を発揮することが見出された。本発明のジ（カル
ボヒドラジドー O、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和
物あるいはその脱水錯体をガス発生剤に使用した場合、
以下の様な優れた特徴を有する。即ち、錯体形成により
カルシウム原子とカルボヒドラジド単一分子とを用いる
場合に比べて耐熱性が向上する。同時に酸化力の強い硝
酸基がカルボヒドラジドと同じ分子に共存するため、カ
ルボヒドラジドと硝酸カルシウムの単純混合物に比べて
反応性が高くなる。

【 0 0 1 4 】本発明のガス発生剤組成物には上記の本発
明のジ（カルボヒドラジドー O、N）カルシウム（II）
硝酸塩一水和物あるいはその脱水錯体をそのまま使用し
ても良いが、酸素バランスから考えると、酸化剤との組
成物として使われることが望ましい。酸化剤は硝酸カリ
ウム、硝酸ナトリウム、硝酸ストロンチウム、硝酸アン
モニウム、亜硝酸カリウム、亜硝酸ナトリウム、過塩素
酸カリウム、過塩素酸ナトリウムから選ばれる少なくと
も 1 種であることが好ましい。酸化剤の含有量は 10～60
重量％が好ましいが、20～50 重量％がより好ましい。

【 0 0 1 5 】また、上記の組成物の成型強度の向上と成
型性の改善のためにバインダと成型助剤を含有させても
良い。バインダはデンプン、ポリビニルアルコール、カ
ルボキシメチルセルロースナトリウム、酢酸セルロー
ス、セルロース等有機系高分子バインダ、あるいはシリ
コンゴム等無機系高分子バインダが挙げられる。成型
助剤はステアリン酸カルシウム、ステアリン酸マグネシ
ウム、ステアリン酸亜鉛、二硫化モリブデン等が挙げら
れる。本発明に基づく化合物のカルシウム成分が燃焼後
に酸化カルシウムになり、スラグ形成時の一成分として
機能するが、より好ましくは燃焼残渣を捕捉するため
に、その他のスラグ形成剤を含有させても良い。スラグ
形成剤としては、二酸化珪素、酸性白土、珪藻土、酸化
アルミニウム、カオリン、タルク等が挙げられる。これ
らの成分の含有量は錯体の含有量と酸化剤の種類により
一概には決定されないが、バインダとして 0 乃至 10 重量
％、成型助剤として 0 乃至 5 重量％、スラグ形成剤とし
て 0 乃至 10 重量％を含有することが望ましい。

【 0 0 1 6 】ジ（カルボヒドラジドー O、N）カルシウ

ム(II)硝酸塩一水和物あるいはその脱水錯体と酸化剤とバインダとスラグ形成剤等の組み合わせにより、アジド系ガス発生剤に比べて単位重量当たりのガス発生効率を大幅に高めることができ、ガス発生器をより小型に設計し得る。実施にあたっては、ジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物あるいはその脱水錯体の粉末と酸化剤とバインダとスラグ形成剤などの粉末に水あるいは有機溶媒を添加し、均一に混合した後、押し出し成型、もしくは、打錠機を用いてペレット状に成型することにより、ガス発生器に充填可能な形態とすることができる。

[0017]

[実施例] 以下実施例により本発明を詳細に説明する

理論値(重量比): C 6.6%

測定値(重量比): C 6.5%

(実施例2) 実施例1の結晶を水から再結晶化し、単結晶X線結晶構造解析を行った結果のORTEP図を図1に示す。このORTEP図により、ジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物は、2分子のカルボヒドラジドが各々酸素原子、窒素原子でカルシウムに五員環のように配位した硝酸塩錯体であることを示している。結晶パラメータ及び配位原子間距離は以下の通りである。

結晶系: 三斜晶系、

空間群: P-1、

格子定数: $a = 9.3533(7) \text{ \AA}$, $b = 9.5257(7) \text{ \AA}$, $c = 8.1681(6) \text{ \AA}$, $\alpha = 91.512(6)^\circ$, $\beta = 99.71(2)^\circ$, $\gamma = 9.732(5)^\circ$, $V = 682.45(9) \text{ \AA}^3$

原子間距離: $\text{Ca(1)-O(1)} 2.443(3) \text{ \AA}$, $\text{Ca(1)-O(2)} 2.415(3) \text{ \AA}$, $\text{Ca(1)-N(1)} 2.587(5) \text{ \AA}$, $\text{Ca(1)-N(5)} 2.553(6) \text{ \AA}$

(実施例3) 上記のジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物を105℃で24時間放置す

が、本発明はこれらの実施例のみに限定されるものではない。

[0018] (実施例1) 22.3gの硝酸カルシウム四水和物を9.5gの水に加えて、70℃まで加熱し溶解する。

また15.7gのカルボヒドラジドを18.3gの水に加えて70℃まで加熱し溶解する。後者の溶液を前者の溶液に滴下し、70~82℃で反応し、70℃で10分間加熱濃縮して、19℃まで自然冷却すると、白色結晶が得られた。これを濾別した後、エタノールで洗浄し24時間風乾してジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物28.0g(収率93%)を得た。得られた結晶を元素分析を行ってその結果を次のように示す。

[0019]

H 3.9% N 38.7%

H 3.8% N 37.5%

ると、重量が5.86%減少し、ジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物の脱水錯体を得られた。この錯体は融点: 204~206℃である。

[0020] (実施例4) 上記のジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物とその脱水錯体については日本工業規格(JIS) K4810-1979の火薬類性能試験法に基づいて摩擦感度試験と落槌感度試験を実施した。その結果、2つの錯体は摩擦感度が36.0kgf以上、落槌感度が100cm以上で、機械感度が鈍感である。

[0021] (実施例5~9及び比較例1) ジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物の脱水錯体を含むガス発生剤組成物、及びアジド系ガス発生剤組成物の理論計算に基づく燃焼温度、ガス発生剤組成物100g当たりの発生ガス量を表1に示す。

[0022]

[表1]

	ガス発生剤組成物	組成比 (wt. %)	燃焼温度 (℃)	発生ガス量 (mol/100g)
実施例5	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2] / \text{KNO}_3$	73.8/26.2	2045	2.76
実施例6	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2] / \text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	73.0/27.0	2273	2.88
実施例7	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2] / \text{Sr}(\text{NO}_3)_2 / \text{澱粉}$	66.4/31.6/2	2277	2.8
実施例8	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2] / \text{KNO}_3 / \text{SiO}_2$	73.8/26.2/8.8	2152	2.67
実施例9	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2] / \text{Sr}(\text{NO}_3)_2 / \text{カオリン}$	73.0/27.0/5	2225	2.74
比較例1	$\text{NaN}_3 / \text{CuO}$	69/31	1101	1.59

[0023] 表1の結果より、ジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物の脱水錯体を含むガス発生剤組成物のガス発生効率は、アジド系ガス発生剤組成物に比べれば、かなり高くなっている。

[0024] (実施例10~13及び比較例2~4) ジ(カルボヒドラジド-O, N)カルシウム(II)硝酸塩一水和物とその脱水錯体及びそれを含むガス発生剤組成物、並びにカルボヒドラジド単体、硝酸カルシウム四水和物

単体、及びカルボヒドラジドと硝酸カルシウム四水和物との単純な混合物の吸熱開始温度、発熱開始温度及びTG(熱重量分析による)重量減少開始温度を株式会社リガク製のTAS型示差熱分析装置により測定した。測定時の昇温速度は20℃/minで、測定雰囲気は窒素ガスで、測定のサンプル量は1~3mgである。その一部の結果を次の表2に示す。

[0025]

【表 2】

	ガス発生剤組成物	組成比 温度 (°C)	吸熱開始 温度 (°C)	発熱分解 開始温度 (°C)	TG重量減少 開始温度 (°C)
実施例10	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2\text{H}_2\text{O}]$	100	52(脱水) 208	258	204
実施例11	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]$	100	208	257	208
実施例12	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2\text{H}_2\text{O}]/\text{KNO}_3$	74/28	52(脱水) 190	218	200
実施例13	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2\text{H}_2\text{O}]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	74/28	52(脱水) 198	258	203
比較例2	CDH	100	143	—	147
比較例3	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	100	47	—	41
比較例4	$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O} + \text{CDH}$	57/43	25	134	40

【0026】表2の結果より、ジ（カルボヒドラジドーO、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物及びその脱水錯体は、その吸熱開始温度（融点）、発熱分解開始温度、TG重量減少開始温度がカルボヒドラジド、カルボヒドラジドと硝酸カルシウムの単純な混合物よりかなり高くなっている。

【0027】（実施例14～20及び比較例5）ガス発生剤に用いたジ（カルボヒドラジドーO、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物の脱水錯体と酸化剤、バインダ、スラグ形成剤などのガス発生剤組成物を調製し、その

組成物をストランドに成型して、 $50\text{kg}/\text{cm}^2$ 、 $70\text{kg}/\text{cm}^2$ 圧力、窒素雰囲気下で燃焼速度を測定した。 $70\text{kg}/\text{cm}^2$ 圧力での燃焼速度及び $50 \sim 70\text{kg}/\text{cm}^2$ 圧力の間での圧力指数を次の表3に示す。表3の結果より、ジ（カルボヒドラジドーO、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物の脱水錯体を含むガス発生剤組成物は優れた燃焼性能を持つことが分かる。

【0028】

【表3】

	ガス発生剤組成物	組成比 (wt. %)	燃焼速度 (mm/秒)	圧力指数 n
実施例14	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{KNO}_3$	74/28	24.35	0.45
実施例15	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	73/27	20.11	0.51
実施例16	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2/\text{酸性白土}$	73/27/5	19.71	0.80
実施例17	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2/\text{カオリン}$	73/27/5	20.57	0.57
実施例18	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2/\text{SiO}_2$	73/27/7	18.78	0.58
実施例19	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2/\text{澱粉}$	70/29/1	19.27	0.71
実施例20	$[\text{Ca}(\text{CDH})_2(\text{NO}_3)_2]/\text{Sr}(\text{NO}_3)_2/\text{ステアリン酸カルシウム}$	89/30.5/0.5	17.99	0.73
比較例5	ニトログアニジン / $\text{Sr}(\text{NO}_3)_2$	53/47	10.0	0.86

【0029】

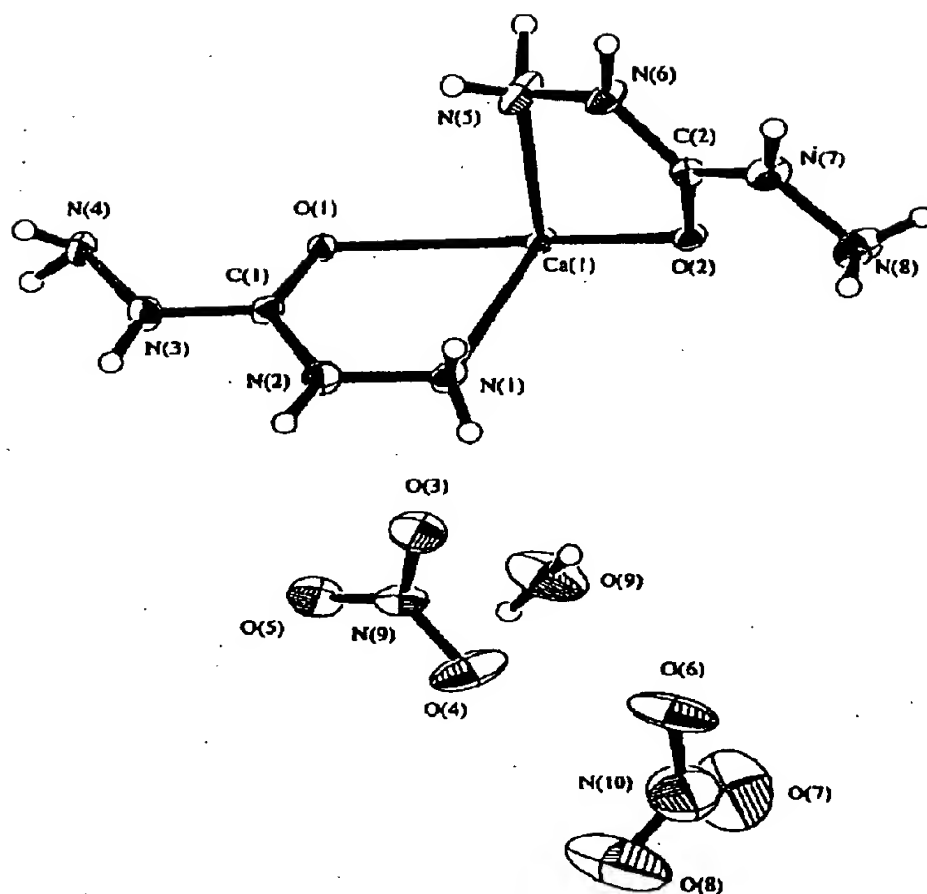
【発明の効果】本発明は新規なジ（カルボヒドラジドーO、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物及びその脱水錯体とその製造方法並びに自動車における乗員保護装置としてのエアバッグ用ガス発生剤組成物を提供するものであり、本発明により低毒性かつ危険性が少なく取扱い

が容易であり、燃焼効率及びガス発生効率に優れたガス発生剤組成物が製造可能となった。

【図面の簡単な説明】

【図1】 本発明のジ（カルボヒドラジドーO、N）カルシウム（II）硝酸塩一水和物のX線結晶解析を行った結果のORTEP図である。

〔 図 1 〕



結晶パラメータ及び配位原子距離

三斜晶系

空間群: $P-1$

格子定数: $a=9.3533(7)\text{\AA}$, $b=9.5257(7)\text{\AA}$, $c=8.1681(6)\text{\AA}$, $\alpha=91.512(6)^\circ$, $\beta=99.71(2)^\circ$, $\gamma=69.732(5)^\circ$, $V=682.45(9)\text{\AA}^3$.

原子間距離: $\text{Ca}(1)\text{-O}(1)$ $2.443(3)\text{\AA}$, $\text{Ca}(1)\text{-O}(2)$ $2.415(3)\text{\AA}$, $\text{Ca}(1)\text{-N}(1)$ $2.587(5)\text{\AA}$, $\text{Ca}(1)\text{-N}(5)$ $2.553(6)\text{\AA}$.